

LC/MS TOF Agilent 6210
**Convierta las muestras en
respuestas**



Agilent Technologies

Convierta las muestras en respuestas

Ya analice fármacos potenciales o muestras medioambientales, proteínas o péptidos sintéticos, el LC/MS TOF Agilent 6210 posee el extraordinario rendimiento analítico, el software potente y específico para cada aplicación y la facilidad de uso que usted necesita para convertir todas sus muestras en respuestas.

El rendimiento líder del sector...

El LC/MS TOF Agilent 6210 está dotado del excepcional rendimiento analítico que usted precisa. Este equipo:

- Proporciona una fiabilidad analítica superior, gracias a su exactitud de masa de 2 ppm
- Resuelve mezclas complejas, distinguiendo los compuestos de interés de las interferencias
- Identifica simultáneamente los componentes de alta y baja abundancia, utilizando su amplio rango dinámico
- Identifica los compuestos no resueltos, incluso en picos cromatográficos estrechos, mediante su adquisición de datos ultrarrápida
- Detecta incluso componentes a bajos niveles por medio de su excepcional sensibilidad
- Adquiere más información acerca de compuestos desconocidos por medio de la alternancia de polaridad de espectro a espectro, especialmente cuando se combina con la fuente multimodo

.... con mayor facilidad

Aunque la exactitud de masa y el rendimiento analítico general del TOF 6210 son superlativos, el funcionamiento es sorprendentemente sencillo. La sintonización automática y el aporte totalmente automatizado de un estándar de referencia interno para la masa, aseguran la máxima eficacia con el mínimo esfuerzo. El software específico para cada aplicación optimiza los resultados y maximiza la productividad en las aplicaciones tanto para las moléculas grandes como para las pequeñas. Y el software para facilitar el funcionamiento manual y la revisión remota de los datos, puede aumentar aún más la sencillez del funcionamiento.

Su exactitud y resolución de masa óptimas incrementan la fiabilidad

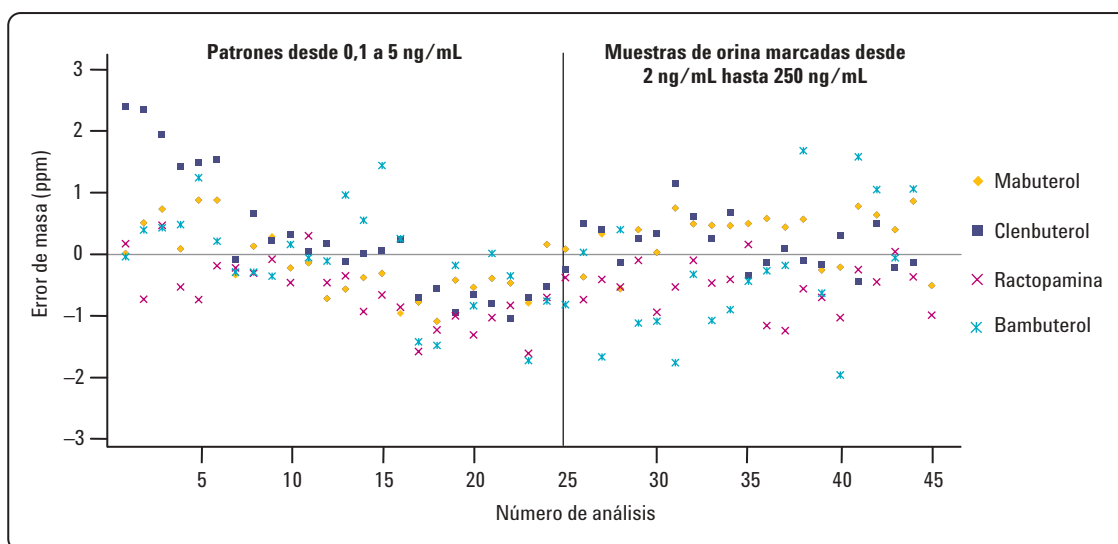
El TOF 6210 ha sido diseñado desde el principio, de forma que proporcione simultáneamente una exactitud y resolución de masas, un rango dinámico

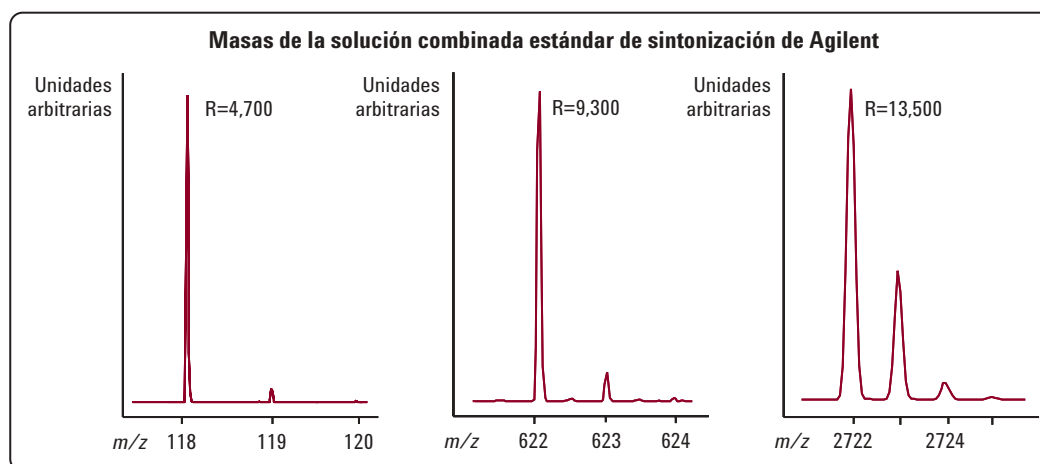
y un ritmo de adquisición espectral excelentes.

En compuestos de bajo peso molecular, la exactitud de masa de 2 ppm del 6210 puede confirmar positivamente la composición elemental e identificar compuestos desconocidos. Para los compuestos de pesos moleculares mayores, puede limitar drásticamente el número de candidatos probables, por lo cual puede llevarse a cabo una identificación positiva basada en una combinación de mediciones exactas de masas e información complementaria.

La excepcional capacidad de resolución del 6210 minimiza la posibilidad de que un pico de una masa de interés pueda agregarse a un ion interferente de la muestra o del fondo. El TOF 6210 puede diferenciar numerosos compuestos con masas nominales idénticas e identifica fácilmente variantes de proteínas atribuibles a modificaciones postranslacionales o mutaciones puntuales.

El TOF 6210 mide rutinariamente masas con exactitudes de 1-2 ppm, como muestran los resultados de esta secuencia de 18 horas, de patrones de β_2 -agonistas y muestras de orina marcadas

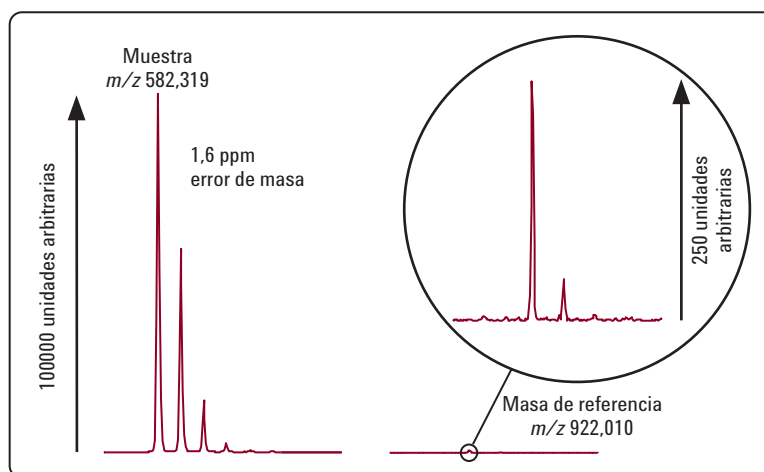




El gran poder de resolución del TOF 6210 garantiza la mayor posibilidad de distinguir todos los componentes de la muestra

El amplio rango dinámico ayuda a identificar componentes minoritarios y simplifica el funcionamiento

El TOF 6210 de Agilent presenta un impresionante rango dinámico de más de 3 órdenes de magnitud en el espectro, sin emplear la atenuación del haz que reduce la sensibilidad en otros equipos de TOF. Este rango dinámico le permite identificar los compuestos menos abundantes en presencia de compuestos significativamente más abundantes, incluso en un único espectro. Además, facilita el acceso manual sin vigilancia porque no hay necesidad de ajustar cuidadosamente la concentración de la muestra al rango de detección del equipo.



El amplio rango dinámico asegura la identificación de los componentes mayoritarios y minoritarios y facilita el uso de un patrón interno

Adquisición espectral rápida para su cromatografía rápida

A un ritmo de 40 espectros por segundo, el 6210 proporciona datos más que suficientes para obtener resultados cualitativos y cuantitativos fiables, incluso cuando se usa la cromatografía más rápida. Podrá identificar componentes sin resolver o escasamente resueltos, incluso en picos estrechos, de uno a dos segundos. La adquisición espectral rápida, asimismo, asegura mediciones de área de pico más exactas para una cuantificación más correcta.

Compatible con la mayor variedad de aplicaciones

Con el LC, fuente de iones y software de Agilent adecuados, el LC/MS TOF Agilent 6210 dará respuesta a numerosos desafíos analíticos: desde la confirmación de la identidad de productos químicos sintéticos, hasta rápidos perfiles de expresión de muestras de proteínas complejas.

Una fuente para cada análisis

El TOF 6210 ofrece una de las más amplias variedades de fuentes iónicas, que incluyen fuentes de doble nebulizador. Las fuentes de doble nebulizador maximizan tanto la exactitud de la masa como la facilidad de uso, introduciendo un patrón de masa de referencia interno por medio de un segundo nebulizador destinado a tal efecto. Esto además facilita la sintonización automática, toda una rareza en equipos de TOF.

- Electrospray de doble nebulizador (ESI) para uso general
- El doble nebulizador de nanospray proporciona una sensibilidad fuera de serie
- APCI para muestras poco polares que no se ionizan adecuadamente por electrospray
- APPI para los compuestos que no responden bien ni a ESI ni a APCI
- Interfase CE-TOF para sacar partido del poder de resolución del CE
- PDF-MALDI* para una proteómica de alta productividad
- El multimodo incrementa la productividad adquiriendo datos ESI y APCI simultáneamente
- HPLC-Chips e interfase HPLC-Chip Cube MS para lo último en separación y sensibilidad



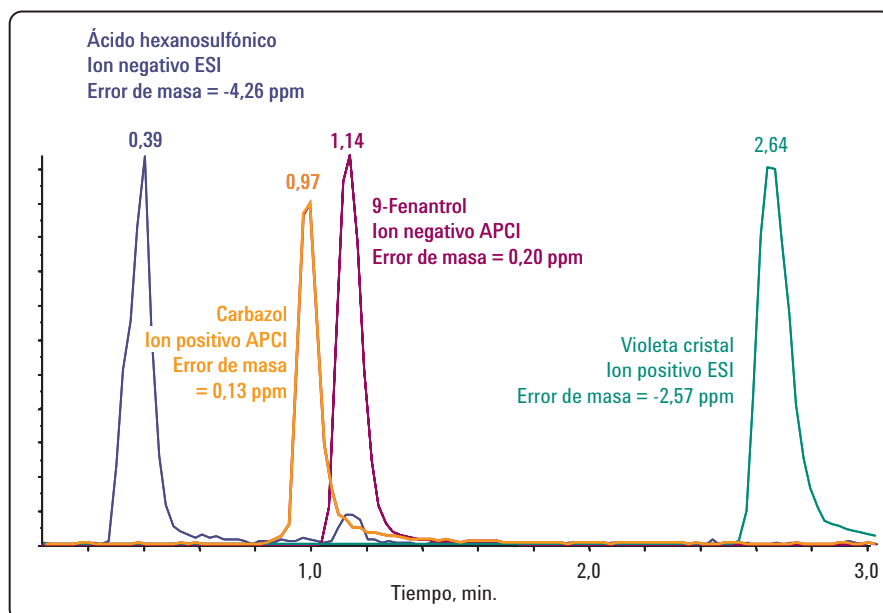
La fuente de iones ESI de doble nebulizador garantiza la máxima exactitud de masa con el mínimo esfuerzo



La interfase HPLC-Chip Cube MS maximiza la sensibilidad y la comodidad



La fuente de iones multimodo puede duplicar el rendimiento y la productividad



En un único análisis, un TOF 6210 con alternancia de polaridad de espectro a espectro y una fuente de iones multimodo, identifica cuatro compuestos, cada uno de ellos respondiendo a una diferente combinación de método y polaridad de ionización

Análisis simplificado de pequeñas moléculas

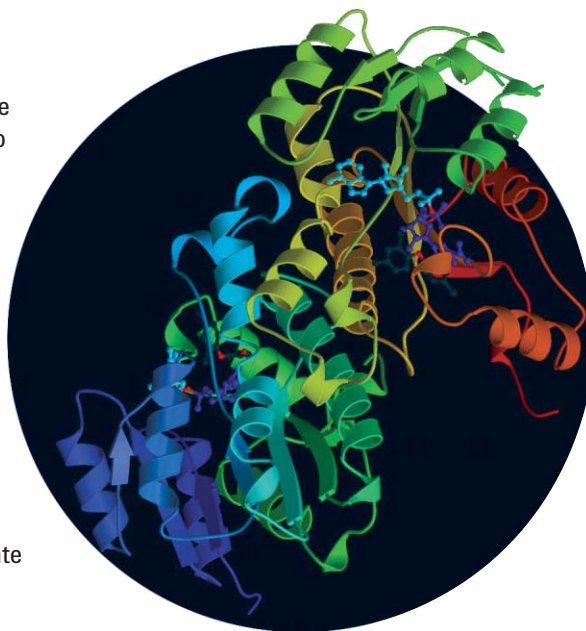
Si realiza cribados de alta eficacia, análisis de impurezas o bien análisis medio-ambientales o forenses, el TOF 6210 le ofrece:

- Software de confirmación de fórmulas empíricas que permite una rápida confirmación positiva de los compuestos esperados
- Software de generación de fórmulas empíricas que aprovecha la potencia de las mediciones exactas de la masa, para identificar impurezas y otros compuestos desconocidos
- Algoritmo de extracción y correlación de características que mejora la exactitud de la determinación de fórmulas empíricas y la búsqueda en bases de datos

Análisis optimizado de biomoléculas

Si su investigación se refiere a proteínas y péptidos, tanto naturales como sintéticos, el 6210 puede combinarse con:

- Software MassHunter Bioconfirmation, para confirmar con fiabilidad las identidades de proteínas y péptidos e identificar tanto variantes inesperadas como compuestos absolutamente desconocidos
- Software MassHunter Profiling que utiliza herramientas optimizadas para localización de compuestos y la visualización de los datos para estudios



diferenciales de expresión y descubrimiento de biomarcadores.

Aumento de la productividad y facilidad de uso

Se dispone de software adicional para hacer accesible la capacidad del TOF a más investigadores y simplificar la revisión de los datos para todo el mundo.

- Software MassHunter Easy Access, que permite un uso sencillo y manual y resulta ideal para equipos compartidos en entornos multiusuario
- Software Data Browser, que facilita la revisión de datos desde PC remotos sin software TOF

Estos paquetes son compatibles con aplicaciones y software de biomoléculas y pequeñas moléculas.



Confirme fácilmente la identidad de moléculas pequeñas e identifique compuestos desconocidos

La exactitud de masa de 2 ppm del TOF 6210 resulta muy apropiada tanto para la confirmación de identidades de compuestos como para la identificación de compuestos desconocidos. En muchos casos, sólo con la medición exacta de la masa es suficiente. En otros, acota los posibles candidatos lo suficiente para que la confirmación o identificación sean mucho más fáciles.

Confirme rápidamente la identidad de los compuestos

El software de confirmación de la fórmula empírica le permite verificar rápida y fácilmente la presencia de compuestos esperados. Partiendo de una fórmula empírica, revisa los espectros extraídos, buscando las masas esperadas. Acaba con las pérdidas neutras, aductos y otras modificaciones frecuentes. El programa genera un informe de confirmación de una sola página para cada compuesto objetivo.

Identifique compuestos desconocidos con el software de generación de fórmula empírica

A partir de los resultados de la lista de masas, puede generar una lista de fórmulas empíricas probables para cada compuesto desconocido. Puede personalizarse la generación de fórmulas mediante una gran variedad de parámetros, que incluyen:

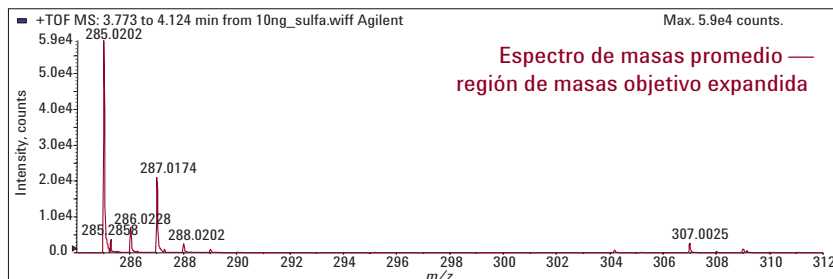
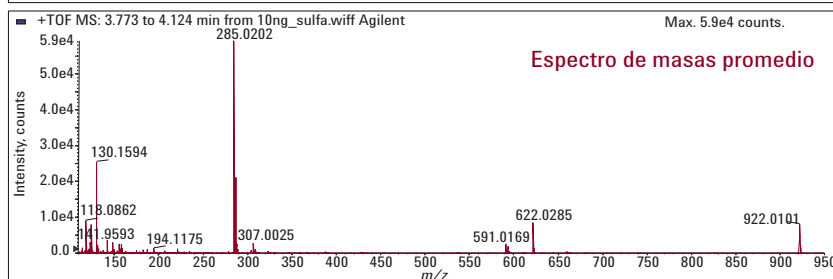
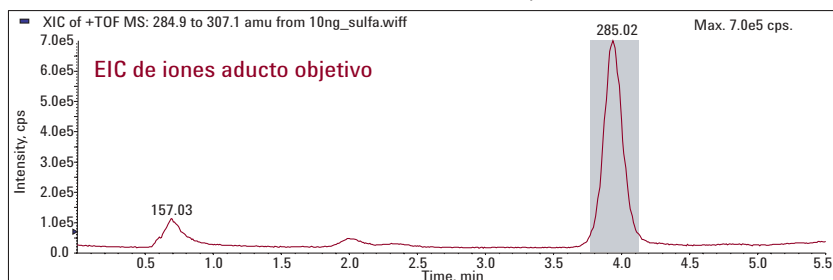
- Tolerancia de masa
- Lista de elementos posibles
- Valores mínimos y máximos para cada elemento
- Estado electrónico (par o impar)
- Carga
- Rango máximo de error
- Número máximo de opciones

Los resultados pueden ordenarse por ajuste a relación isotópica o por error de masa.

Empirical Formula Confirmation Report

Page 1 of 1

Empirical Formula: **C₁₀H₉ClN₄O₂S** †Exact Mass: **284.01347** †Sample Name: **10 ng sulfa** †Sample ID:
Data File Name: **p:\Projects\sulfa 2\Data\10ng_sulfa.wiff** †Acq Time: **May 08 2005, 12:05:38 PM**



Species	Abundance (counts)	Target Mass (amu)	Measured Mass (amu)	Mass Error (m/z)	Mass Error (ppm)
[M+H] ⁺	59329.42	285.02075	285.02019	-.00056	-1.97
[M+Na] ⁺	2799.10	307.00270	307.00248	-.00021	-.70

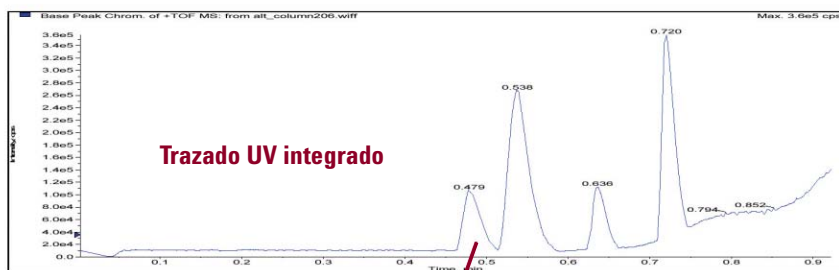
Page 1 of 1

Thursday, May 8, 2005

El informe de confirmación de la fórmula empírica muestra información imprescindible del resultado para cada compuesto objetivo

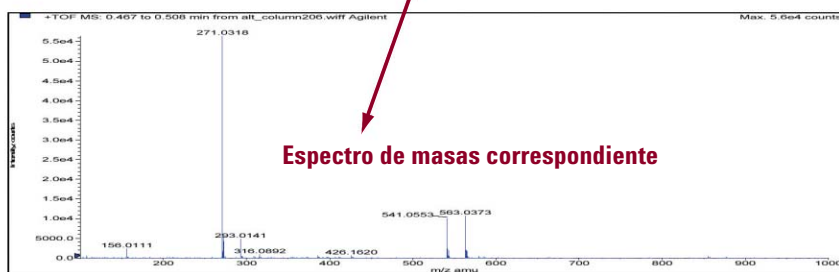
*La fuente PDF-MALDI es un producto Láser Clase I

Sample#: sulfa.mix Sample Location: Sample Id: Operator:
Data File Name: d:\pe.scielex\data\Projects\report.app\note\data\alt_column206.wiff Acq Time: November 19 2003, 04:44:23 PM
Method: D:\TOF_Data\damethods\EXX_EFG.anm\mass_list.xml



Period#: 1 Experiment#: 1

Peak#	Experiment#	Time	Area	Most Abundant	Masses/scan
1	1	0.48	1.41327 E5		271.03181
2	1	0.54	4.38872 E5		279.09140
3	1	0.64	1.12099 E5		285.02057
4	1	0.72	3.52979 E5		311.08153



Peak#: 1 Experiment#: 1 Retention Time: 0.48 min

Mass Value = 271.03181

#	Formula (+1)	Calculated m/z	Error (mDa)	* Error (ppm)	DBE	Isotope Match	Intensity Match
1	C9H11N4O2S2	271.03180	0.01	0.1	6.5	997	66290
2	C10H17O2SCl2	271.03208	-0.27	-1.0	1.5	732	66290
3	C9H3N8O3	271.03226	-0.45	-1.7	12.5	998	62049
4	C17H7N2S	271.03245	-0.64	-2.3	15.5	0	0
5	C4H12N6S2Cl	271.03094	0.87	3.2	2.5	846	56655
6	C8H7N4O7	271.03093	0.88	3.3	7.5	999	62049
7	C19H8Cl	271.03090	0.91	3.3	15.5	937	66290
8	C7H12N2O7Cl	271.03276	-0.95	-3.5	2.5	0	0

Fórmulas posibles

El programa de generación de fórmulas empíricas produce una lista de las identidades más probables basada en los datos de masa exactos y las prioridades y otros detalles de su muestra

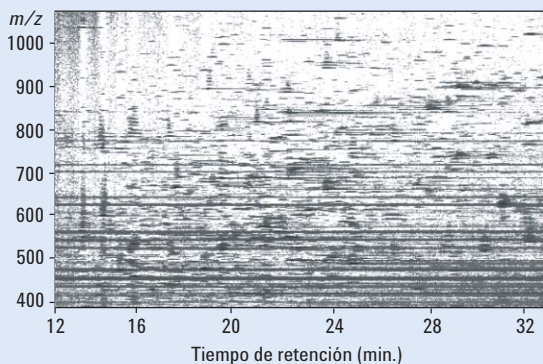
Convierta los datos primarios en datos útiles

El nuevo y potente algoritmo de extracción y correlación de características, mejora el análisis cualitativo de mezclas complejas de péptidos o de moléculas más pequeñas. Por medio de la identificación de información relacionada en los datos primarios, aumenta la exactitud de la determinación de la fórmula empírica o de la búsqueda en bases de datos.

El algoritmo de extracción y correlación de características localiza los grupos de iones covariantes en un cromatograma. Cada uno de estos grupos representa un único compuesto. Así, el algoritmo identifica todos los componentes del cromatograma, en lugar de hacerlo sólo con los picos cromatográficos, los cuales pueden encubrir múltiples componentes. Esto facilita una eliminación muy efectiva de los datos del fondo químico.

Tras la identificación de los componentes y la supresión del fondo, el algoritmo asigna los estados de carga. También identifica aductos, por lo que el ion molecular y el aducto pueden tratarse como un único compuesto. Más aún, el algoritmo identifica isótopos y registra sólo masas mono-isotópicas para una determinación de la fórmula empírica y unas búsquedas en bases de datos más correctas.

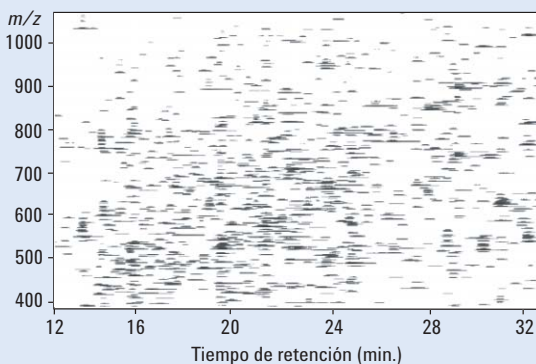
~170 millones de puntos de datos



Algoritmo de extracción
y correlación de
características
aplicado



~1,600 características moleculares



El procesamiento de los datos primarios con el algoritmo de extracción y correlación de características identifica aproximadamente 1.600 compuestos de los 170 millones de puntos de los datos primarios de una muestra de BSA marcada con mioglobina. Estos ejemplos se centran en una pequeña región de la representación total de los datos.

Convierta los datos proteómicos en respuestas

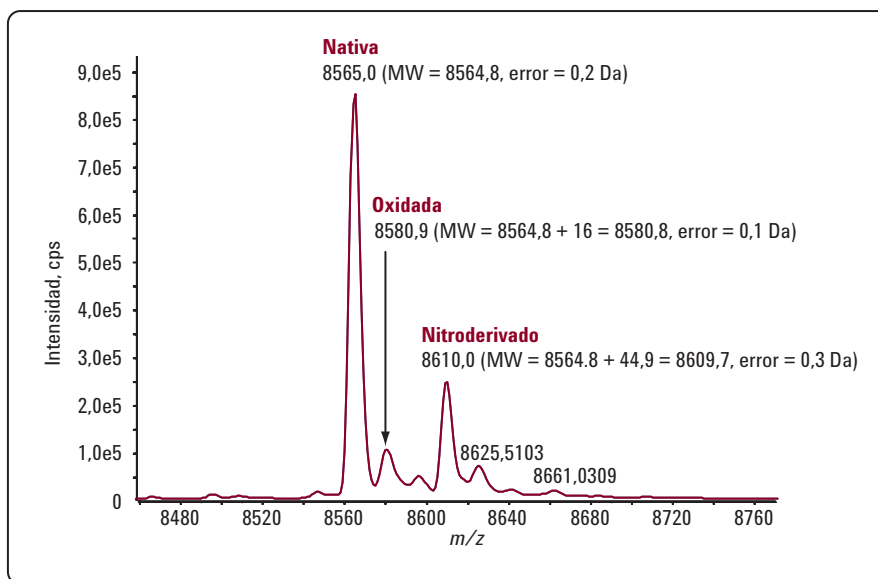
La exactitud, resolución y reproducibilidad extraordinarias del TOF 6210 lo convierten en una importante plataforma para la investigación de proteínas. Los paquetes de software refinados para confirmación de proteínas y perfiles de expresión hacen más sencilla la conversión de datos superiores en respuestas útiles.

Confirme identidades e identifique variantes con el software de bioconfirmación

Si investiga acerca de síntesis de proteínas recombinantes o péptidos, el software MassHunter Bioconfirmation de Agilent le ayudará a confirmar las identidades e identificar variantes antes de emprender costosos ensayos.

Resultados más exactos mediante deconvolución optimizada

Los análisis de espectros de proteínas y de péptidos comienzan con la deconvolución. Al contrario que otros softwares de la competencia, el software de bioconfirmación contiene algoritmos independientes de deconvolución, uno optimizado para proteínas y el otro para péptidos.



El software MassHunter Bioconfirmation es capaz de discernir formas modificadas de proteínas, como se muestra en este espectro deconvolucionado de tres productos mayoritarios en una muestra de ubiquitina tratada con peroxinitrito

Sample Name: *Beta-Lac-2pmol* Method Name: *F1TOFdamethods\protein_small_tol_25.anm*
Data File Name: *F1TOFdata\BetaLac.wiff* Acq Time: *March 16 2004, 09:52:16 AM*

TargetProteins

Protein	Target Mass Average (Da)	Measured Mass Average (Da)	Measured Mass Apex (Da)	Area	+/- (Da)
	18277.1700	18277.1391	18277.0266	1238472.6971	-0.0309
	18363.2600	18363.2551	18363.0266	1298021.2043	-0.0049

Variantes A y B

OtherProteins

Measured Mass Average (Da)	Measured Mass Apex (Da)	Area	Time (min)
18363.2551	18363.0266	1298021.2043	3.76
18277.1391	18277.0266	1238472.6971	3.76
18362.9925	18376.0266	922081.2178	3.76
18410.6222	18410.0266	265030.2922	3.76
18297.0366	18297.0266	258021.0757	3.76
18461.2824	18461.0266	187922.8999	3.76
18324.1605	18324.0266	163183.0441	3.76
18396.7208	18396.0266	118587.3214	3.76

Otras proteínas no-objetivo encontradas

Una mejor extracción de características moleculares favorece la identificación de los péptidos

El software MassHunter Bioconfirmation utiliza el algoritmo de extracción y correlación de características para localizar con gran exactitud todos los compuestos, no sólo la totalidad de los picos, en complejas mezclas de péptidos. Pueden importarse las listas de masas resultantes, a un programa de búsqueda en bases de datos, como el Spectrum Mill de Agilent para el software MassHunter, para su rápida identificación mediante la técnica de "huellas dactilares" de masas de péptidos.

Rápida y eficiente confirmación para proteínas recombinantes...

El software de bioconfirmación le ayuda a confirmar con rapidez y eficiencia la identidad de proteínas recombinantes intactas. Genera un informe de confirmación de proteínas para cada muestra que verifica la proteína esperada y enumera los pesos moleculares y otros datos de variantes inesperadas e impurezas.

Detalle del Informe de Confirmación de Proteína del análisis de β -lactoglobulina, que muestra proteínas objetivo (variantes A y B) confirmadas con errores de masa de pocas ppm

... e identificación de variantes inesperadas

Cuando la confirmación de identidad encuentra variantes inesperadas, la digestión proteolítica y el reanálisis con la función de mapeo de masas de péptidos del software de bioconfirmación, pueden distinguir entre las partes de la secuencia real que coinciden con la secuencia esperada y las que no, aportando una valiosa información sobre la ubicación y la naturaleza de la variación.

Software de perfiles de expresión para un descubrimiento eficiente de biomarcadores, y más

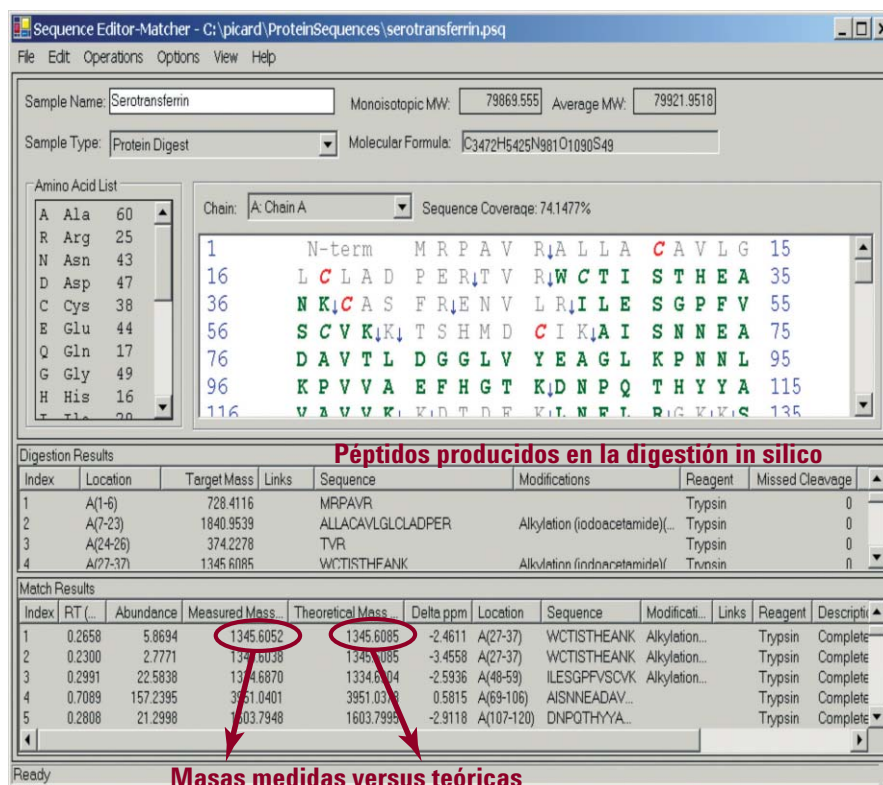
Eligiendo el LC y la fuente de iones Agilent apropiados, el TOF 6210 constituye un excepcional equipo para obtener unos perfiles de expresión rápidos y eficientes. El software MassHunter Profiling de Agilent lo hace más fácil mediante herramientas optimizadas tanto para la localización de compuestos como para la visualización de datos. Otra aplicación es la QA/QC de glicoproteínas por medio de perfiles de expresión de glicanos libres.

Excelente localización de compuestos

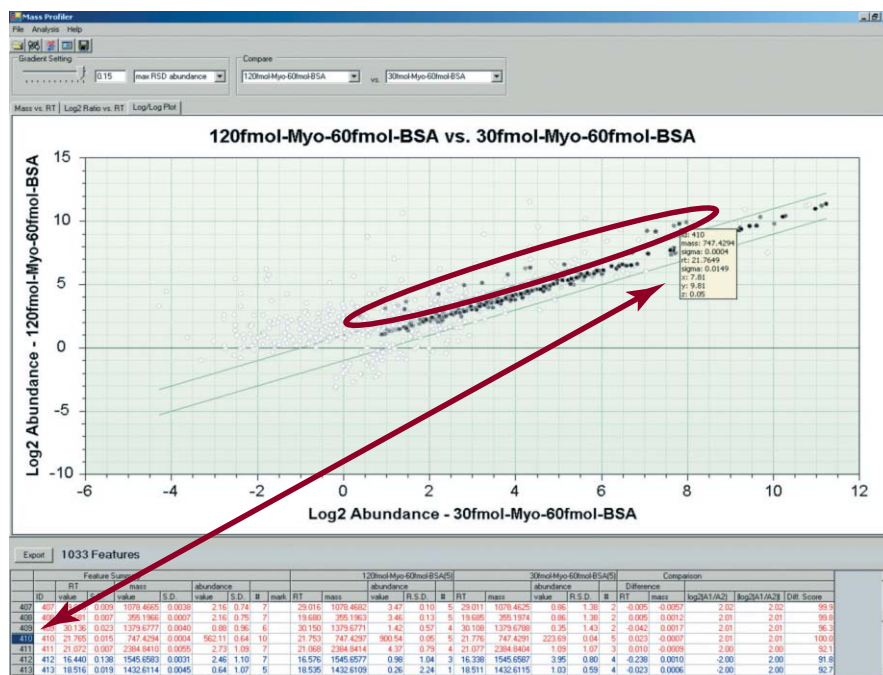
El software MassHunter Profiling utiliza el algoritmo de extracción y correlación de características, optimizando la tarea de localizar todos los componentes incluso en mezclas de péptidos muy complejas.

Potentes comparaciones estadísticas y visualización

El software MassHunter Profiling compara estadísticamente los resultados de dos muestras y presenta múltiples variables tales como masa, tiempo de retención y abundancia, en tablas o gráficas.



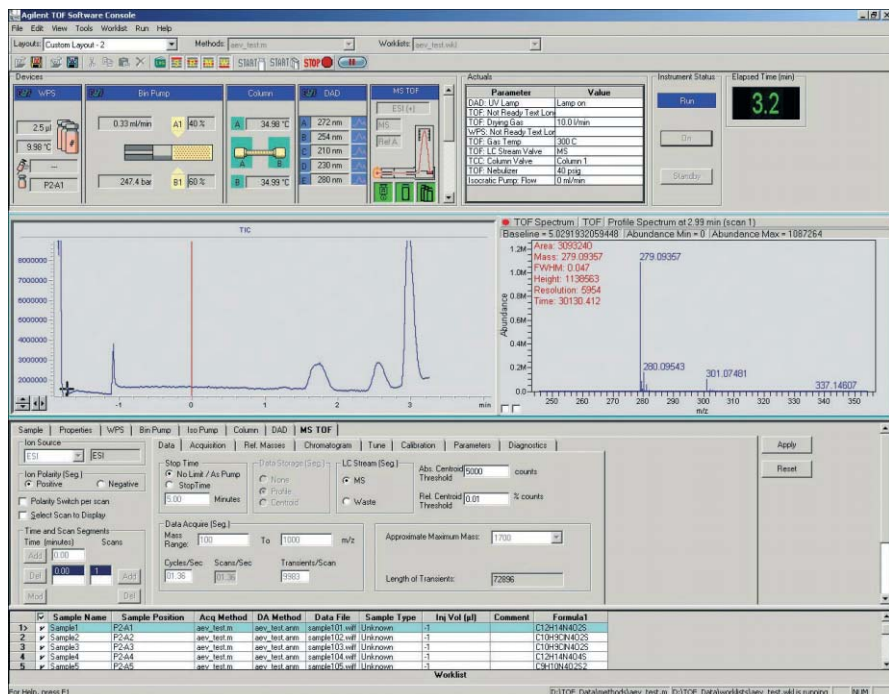
Cuando el análisis de proteínas recombinantes indica que se ha producido la proteína errónea, la secuencia interactiva editor/comparador ayuda a localizar la ubicación de la variación



El BSA marcado con dos niveles diferentes de mioglobina simula una muestra biológica con proteínas diferencialmente expresadas. El software MassHunter Profiling identifica con claridad los iones de mioglobina presentes a diferentes "niveles de expresión". En la tabla de características se muestra información específica sobre cada una de ellas y puede visualizarse en recuadros emergentes individuales.

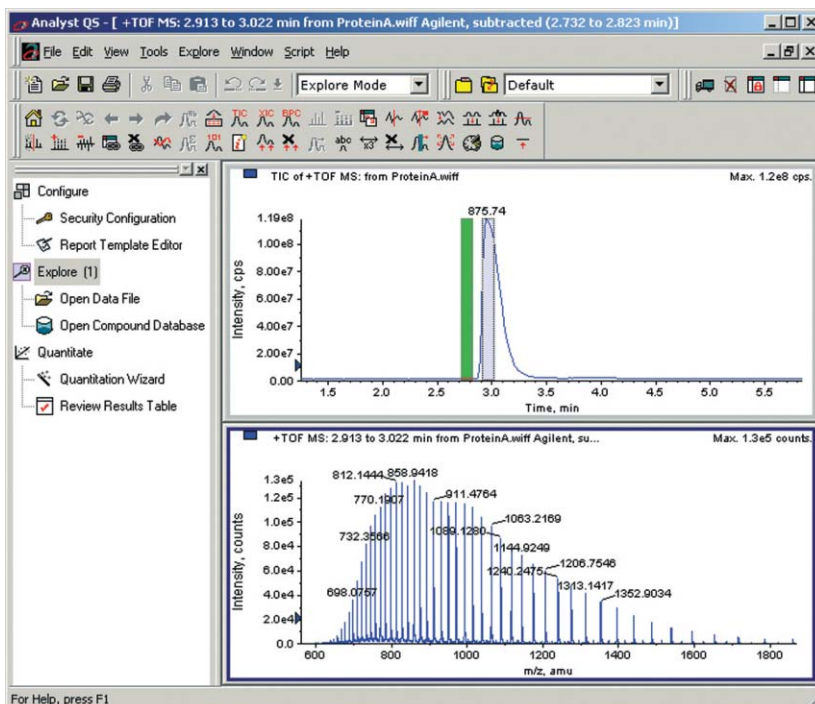
Máxima productividad con un software bien diseñado

El TOF 6210 utiliza el software de adquisición de datos MassHunter Workstation de Agilent para simplificar la configuración y el funcionamiento, así como para maximizar la eficacia, independientemente de la aplicación. El software adicional para el aumento de la productividad facilita el acceso manual compartido para múltiples usuarios y la revisión remota de datos.



El fácil uso del software de control del instrumento y de adquisición de datos, ya con todas sus funciones, deja todo el control en sus manos

El software de análisis de datos incluye una colección de herramientas para un análisis cualitativo y cuantitativo eficiente



Configuración y adquisición más rápidas y sencillas

Tanto si es usted un experto o un nuevo usuario de LC/MS, el software MassHunter Workstation simplifica en gran medida el uso de su sistema LC/MS.

- Sintonización automática: un programa contrastado y fiable maximiza el rendimiento y minimiza el esfuerzo.
- Ahorre tiempo en la configuración de sus análisis: importe listas de trabajo directamente desde programas de hojas de cálculo como Microsoft® Excel.
- Opere desde una única interfase de usuario: se puede configurar una única interfase para LC y MS de modo que muestre sólo la información que necesite.

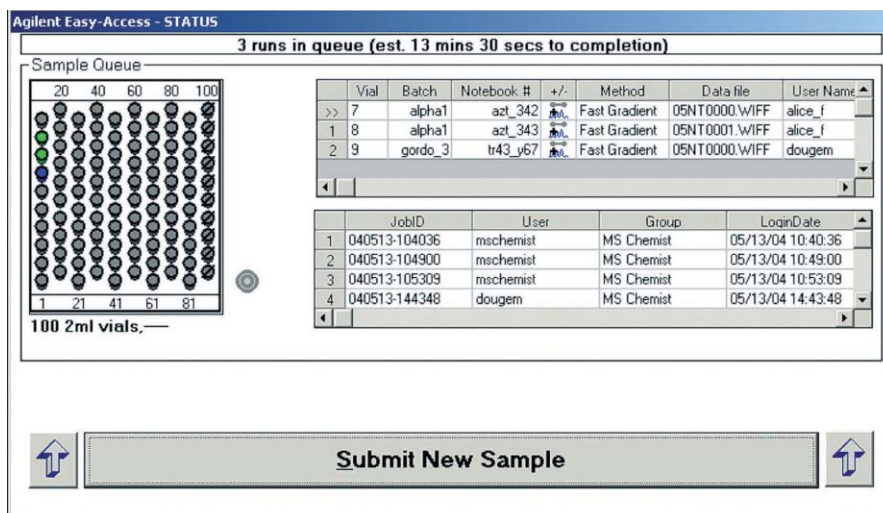
Potente análisis de datos

El software de análisis de datos proporciona respuestas tanto cualitativas como cuantitativas. Se pueden ampliar sus capacidades con paquetes de software específicos de aplicaciones para confirmación e identificación de pequeñas moléculas, o perfiles de expresión y confirmación de proteínas.

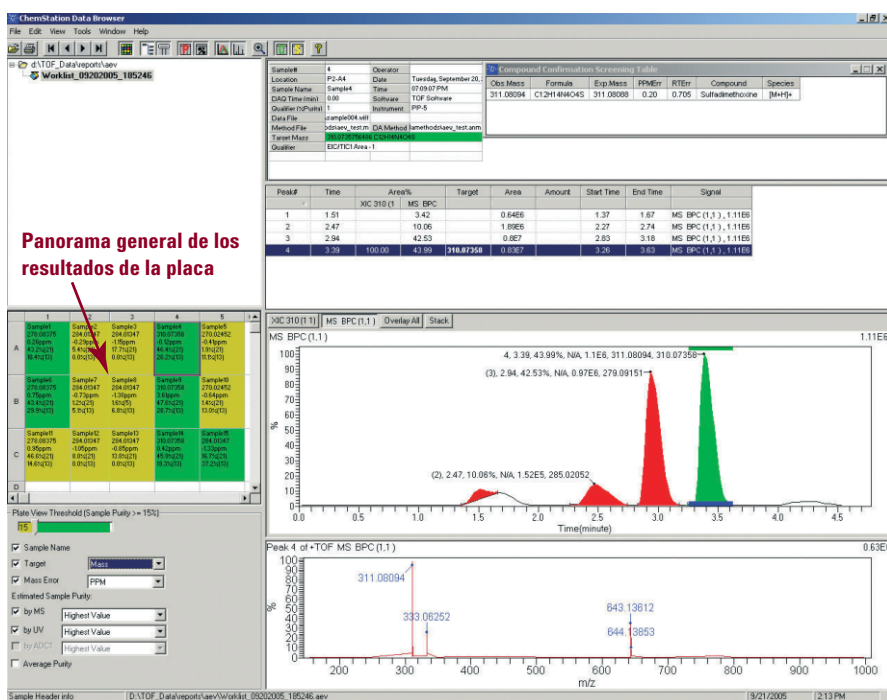
Acceso manual y sencillo a medidas exacta de masas de hasta 2 ppm

El software MassHunter Easy Access de Agilent facilita el acceso a una exactitud de masa muy superior a la que nunca antes había estado a su disposición en un sistema manual. El software MassHunter Easy Access permite acceder manualmente con facilidad al TOF, introducir información básica de la muestra y seleccionar un método analítico de una lista.

El software incluso señala dónde colocar el vial de la muestra. Los resultados se distribuyen por correo electrónico y pueden ser configurados de modo que incluyan sólo la información que necesite.



El software Easy Access presenta una interfase de usuario simplificada, que lo hace más fácil para todo el mundo, desde expertos a novatos, para confirmar productos de síntesis o identificar compuestos desconocidos



El software Data Browser facilita la revisión remota de los datos

El software Data Browser de Agilent le permite revisar todos los resultados del TOF sin tener instalado el software TOF en su PC. Se trata de un complemento ideal a las capacidades manuales del software Easy Access; éste envía automáticamente por correo electrónico los ficheros de datos al PC de su oficina, donde el software Data Browser le facilita la revisión rápida y sencilla de los datos.

Para lograr una confirmación de alta productividad, el software Data Browser muestra los resultados de una placa de pocillos completa en un solo gráfico. La práctica codificación por colores muestra, de un vistazo, qué análisis finalizaron con éxito. También puede incluir información sobre el error de masas y la pureza de la muestra.

La revisión remota de datos del TOF, independientemente de la aplicación, se ve facilitada por el software Data Browser

En análisis de compuestos desconocidos, el software Data Browser muestra fórmulas empíricas o los resultados de las búsquedas en bases de datos.

Para más información

Para más información:
www.agilent.com/chem/tof

Compras online:
www.agilent.com/chem/store

Encuentre un centro de atención al cliente Agilent en su país:
www.agilent.com/chem/contactus

Especificaciones

Rango de masas
 m/z 50-12.000

Exactitud de masa
< 2 ppm, RMS, medida en el ion (M + H)⁺ de la reserpina (m/z 609,2807) usando masa de referencia interna

Resolución
Mayor que 13.000 medida a m/z 2722

Velocidad de adquisición espectral
20 espectros/segundo desde m/z 100 hasta 3.000

40 espectros/segundo desde m/z 100 hasta 1.000

Especificación de sensibilidad
> 10:1 señal-ruido (pico a pico) en el ion (M + H)⁺ con m/z 609,2807 para inyección en LC/MS de 10 pg de reserpina en columna

Condiciones
Columna - ZORBAX de resolución rápida SB-C18 2,1-30 mm 3,5 micras

Fase móvil - 25% agua
75% metanol 5 mM acetato amónico

Flujo - 400 µL/min

Alternancia de polaridad
Intercambio de polaridad de espectro a espectro de 1 ciclo completo positivo/negativo por segundo

Servicio global y soporte

Agilent se ha ganado su reputación por ser una de las mejores organizaciones en servicio y soporte del sector de la biociencia y el análisis químico. Nuestras sofisticadas comunicaciones, tecnologías e infraestructura nos permiten operar de forma homogénea en más de 40 países; de este modo podemos ayudarle dondequiera que esté. Nuestra perspectiva global no nos impide prestar un servicio local que atienda hasta el más mínimo detalle.

EE.UU. y Canadá

1-800-227-9770
agilent_inquiries@agilent.com

Europa

info_agilent@agilent.com

Asia Pacífico

adinquiry_aplsca@agilent.com

Sólo para uso en investigación. La información, descripciones y especificaciones que aparecen en este folleto están sujetas a cambios sin previo aviso.

Agilent Technologies no se responsabiliza de los errores que pudieran aparecer o de los daños accidentales subsecuentes en relación con el acondicionamiento, prestaciones o uso de este material.

© Agilent Technologies, Inc. 2006
Impreso en Holanda. el 15 de abril de 2006
5989-3600ES



Agilent Technologies